

Z. 材料模拟、计算与设计

分会主席：赵纪军、刘利民、陈星秋、吕广宏、陈时友、张立军、管鹏飞

单元 Z-1: 10 月 25 日下午

主持人：高旺，常可可

地点：青岛国际会展中心 5 号馆 5701

13:30-13:40 Z 分会开幕式

13:40-14:00 Z-01 (Invited)

薄膜材料的计算与设计

常可可

中科院宁波材料所

14:00-14:20 Z-02 (Invited)

单层 TaSe₂ 电荷密度波与莫特相变的第一原理研究

司晨

北京航空航天大学

14:20-14:40 Z-03 (Invited)

具有优异的抗氧化性和高载流子迁移率的二维半导体

郭宇

大连理工大学

14:40-15:00 Z-04 (Invited)

Ti₃C₂S₂ 层间锌离子电池性能的第一性原理研究

类淑来

湖北文理学院

15:00-15:10 Z-05

七原子层二维材料 MA₂Z₄ 家族的结构构造及物性研究

王磊

中国科学院金属研究所

15:10-15:20 Z-06

Contrasting oxygen reduction reactions on zero- and one-dimensional defects of MoS₂ for versatile applications

郝宇

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

15:20-15:30 Z-07

第一原理计算石墨一炔吸附在 Ti(0001) 表面上的成键机理

张欣

中国科学院金属研究所

15:30-15:40 Z-08

A facile approach to tune graphene-metal interface towards superior graphene coatings used in realistic environments

孙天宇

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

15:40-16:00 茶歇

16:00-16:20 Z-09 (Invited)

通过材料本征性质获取表面能和吸附能的简单模型

高旺

吉林大学

16:20-16:40 Z-10 (Invited)

反应气氛下单原子催化剂上 CO 氧化的反应网络和动力学模拟

刘新

大连理工大学

16:40-17:00 Z-11 (Invited)

锐钛矿相 TiO₂ 掺杂的高通量 HSE 计算研究

郑家新

北京大学深圳研究生院

17:00-17:20 Z-12 (Invited)

酰胺化咯嗪衍生物光物理性质的理论研究

郭慧敏

大连理工大学

17:20-17:40 Z-13 (Invited)

The photoelectric properties of bilayer systems based on Ga₂STe and In₂STe

王小龙

大连理工大学

17:40-17:50 Z-14

拓扑声子材料数据库

李江旭

中国科学院金属研究所

17:50-18:00 Z-15

使用普适描述符来研究配位环境对氮还原反应的影响

戚刘健

吉林大学

单元 Z-2: 10 月 26 日上午

主持人：张华磊，王海涛

地点：青岛国际会展中心 5 号馆 5701

08:30-08:50 Z-16 (Invited)

基于多物理场耦合方法的不锈钢暂态缝隙腐蚀仿真模拟

王海涛

中国科学院金属研究所

08:50-09:10 Z-17 (Invited)

复杂结构和多级构筑材料的有限元模拟

王绍钢

中国科学院金属研究所

09:10-09:30 Z-18 (Invited)

溶质元素对纳米晶合金体系热稳定性的界面调控机理研究

唐法威

北京工业大学

09:30-09:40 Z-19

通过测量介电常数来有效区分高压氢的结构

陈达

吉林大学

09:40-09:50 Z-20

晶格错配对晶界相变的影响

帅熊

中南大学

09:50-10:00 Z-21

适用于腐蚀研究的铁-水体系反应力场开发

黄蕴

湖南大学

10:00-10:10 Z-22

纳米 Cu 催化剂表面 C_n(n=1-3) 浓度和流量分布的多物理场模拟

鄢鹏旭

西安交通大学

10:10-10:20 Z-23

一个有效的模型来表征表面能及其与吸附能的关系

李博

吉林大学

10:20-10:40 茶歇

10:40-11:00 Z-24 (Invited)

CrMnFeCoNi 高熵合金的广义层错能的第一性原理研究

张华磊

西安交通大学

11:00-11:20 Z-25 (Invited)

Helium and hydrogen behavior in oxide dispersion strengthened (ODS) steel: Insights from ab initio modeling

孙丹

中国核动力研究院

11:20-11:30 Z-26

HfNbTaTiZr 系高熵合金相分解的第一原理研究

陈树明

中国科学院金属研究所

11:30-11:40 Z-27

β 钛合金中 $\{332\}<113>_{\beta}$ 孪晶界处马氏体的形核及本征微观演变行为的第一原理研究

陈秋捷

中国科学院金属研究所

11:40-11:50 Z-28

体心立方铁磁及顺磁态 Fe 和 Fe-Cr 合金孪晶机制的第一性原理研究

王慈

中国科学院金属研究所

11:50-12:00 Z-29

富锂层状正极材料 Li_2MnO_3 中 Mn 反位缺陷的第一性原理计算研究

张时维

中南大学

12:00-12:10 Z-30

尖晶石结构 LiMn_2O_4 中点缺陷性质的第一性原理计算研究

李旭

中南大学

单元 Z-3: 10 月 26 日下午

主持人: 高洋洋, 王宗国

地点: 青岛国际会展中心 5 号馆 5701

13:30-13:50 Z-31 (Invited)

基于深度学习的晶体结构预测软件

王宗国

中国科学院计算机网络信息中心

13:50-14:10 Z-32 (Invited)

镁铝合金中析出相对孪晶生长的阻碍作用

汤笑之

北京交通大学

14:10-14:30 Z-33 (Invited)

第二相颗粒钉扎晶界的分子动力学研究

周健

苏州大学

14:30-14:50 Z-34 (Invited)

A molecular dynamics study on the main features of second phase growth in an fcc/bcc pure iron system

Zhipeng Sun

中国核动力研究院

14:50-15:10 Z-35 (Invited)

相场法对镁合金再结晶模拟中储能项构造和作用的研究

吴艳

武汉轻工大学

15:10-15:20 Z-36

应用机器学习预测损伤起源点

张胜

上海交通大学

15:20-15:40 茶歇

15:40-16:00 Z-37 (Invited)

交联聚合物纳米复合材料裂纹引发、扩展与化学键断裂的分子动力学模拟研究

高洋洋

北京化工大学

16:00-16:10 Z-38

高压载荷下 FCC CoCrFeMnNi HEA 响应行为与机理的原子模拟

刘贝贝

湖南大学

16:10-16:20 Z-39

循环剪切下咪唑离子液体液晶相形成的分子动力学研究

刘敏

中南大学

16:20-16:30 Z-40

7136 铝合金型材挤压过程动态再结晶演变模拟和实验研究

牛关梅

中铝材料应用研究院有限公司

16:30-16:40 Z-41

钛合金-芳纶纤维复合材料胶接接头渐进失效试验

邹田春

中国民航大学

16:40-16:50 Z-42

基于缺陷和掺杂技术的电池材料阴阳离子电化学调控

李浩欣

上海第二工业大学

16:50-17:00 分会闭幕式

墙报

时间: 10 月 25/26 日中午 11:00-13:15

主持人: 赵纪军

Z-P01

磷烯基 vdW 异质结电子性能的应变与电场工程及应用

李玲霞

兰州理工大学

Z-P02

β 型 Ti-23.1Nb-2.0Zr-1.0O 合金 $\{332\}<113>$ 孪晶传输行为及其对孪晶形貌的影响

孟智超

中国科学院金属研究所

Z-P03

高负载率内在活性位点的氨合成单原子催化剂: 二维钨叶啉纳米片

姚雪

吉林大学

Z-P04

第一性原理研究 half-Heusler 热电材料中点缺陷对晶格热导率的影响

戴胜男

上海大学

Z-P05

晶粒尺寸和温度对纳米多晶镍钴合金力学性能的影响

董常玉

兰州理工大学

Z-P06**H₂S 在 Fe (100) 表面吸附解离的从头算分子动力学研究**

魏世凯

中国石油大学 (北京)

Z-P07**一维原子碲链中巨大的 Rashba 自旋轨道带劈裂**

韩婕

吉林大学

Z-P08**石墨烯上单分散铁原子催化 CO 氧化反应机理**

刘新

大连理工大学化学系

Z-P09**富 Cu 端 Fcc 相 Cu-Ag-Ni 合金扩散动力学研究**

钟梁

中南大学

Z-P10**LiFe_{1-n}N_nP_{1-m}M_mO₄ 橄榄石正极材料的结构稳定性, 电子性能和电压曲线**

崔志红

兰州理工大学

Z-P11**一箱四件双层刹车盘铸造成型数值模拟**

董卫平

浙江师范大学

Z-P12**N4 系列长氮链稠环含能化合物的热分解机理计算研究**

张应朝

青岛科技大学

Z-P13**钛铝合金中 γ/γ' 界面类型选择及其力学性能评估**

张金虎

中国科学院金属研究所

Z-P14**纳米多晶铝力学性能与变形机制的分子动力学模拟**

杨丹

兰州理工大学

Z-P15**一种二维高温狄拉克半金属 CrO₂ 的第一性原理研究**

何沈达

湘潭大学

Z-P16**氮气分子在 β -Zr 表面吸附的第一性原理研究**

黎星町

湖南大学

Z-P17**卤素官能化 MXene 的组分依赖性和电子结构性质的第一性原理研究**

姜雨晨

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

Z-P18**以本征描述符预测合金催化活性的机器学习方案**

杨泽

吉林大学